2005 年度非平衡物理学 授業ノート 9

2005.12.22 担当 吉森 明

3-4. 久保公式

例題(3-4 が終わって出来るようになる問題): レーザー場の中のコロイド粒子を考える。コロイド粒子の位置を $X = X(t)$ として、レーザーによるポテンシャルが $u(X) = k(X - x_0)^2/2$ で与えられる時、このポテンシャルの中でのコロイド粒子の位置の時間相関関数を、レーザーの中心 x_0 を時間変化させて測る方法を考えなさい。

○ 証明の流れ

① 数学的な準備 – 遷移確率 $T(x, x'; t)$

② $T(x, x'; t)$ で $\langle X(t) \rangle$ と $\langle X(t)X(0) \rangle$ を表す。

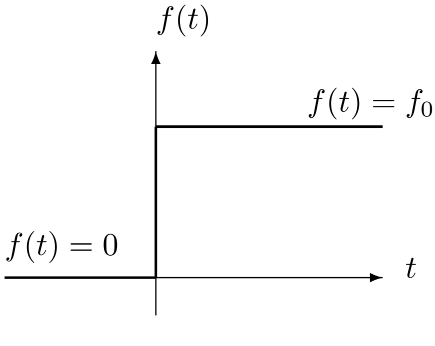
③ 特定の外場をかける。$\longrightarrow$ 別の外場でも OK。

④ 遷移確率を外場で展開。2 次以上を無視する。

(3) 久保公式の導出

③ 特定の外場をかける。

$\alpha(t)$ は、外場 $f(t)$ によらないので、特別な $f(t)$ で計算しても良いから、ここでは次の外場を考える。



$$f(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ f_0 & t \geq 0 \end{cases} \tag{1}$$

この外場の場合、$x(t) = \langle X(t) \rangle$ は、f_0 の関数になっていると考えられる。そこで、f_0 でテーラー展開をすると、

$$x(t) = \Psi(t) f_0 + \Psi_2(t) f_0^2 + \Psi_3(t) f_0^3 + \cdots \tag{2}$$

ここで、$f = 0$ で $x(t) = 0$ とした。また、$\Psi(t)$ と $\alpha(t)$ は簡単な関係が成り立つ。

$\Psi(t)$ と $\alpha(t)$ の関係を求めるために、$\alpha(t)$ を使って、f_0 による展開を書くと、

$$x(t) = \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')f(t')dt' + \Psi_2(t)f_0^2 + \Psi_3(t)f_0^3 + \cdots \tag{3}$$

(1) 式を代入すると、

$$= \int_0^t \alpha(t-t')f_0 dt' + a_2 f_0^2 + a_3 f_0^3 + \cdots \tag{4}$$

$\tau = t - t'$ に変数変換

$$= \int_0^t \alpha(\tau)d\tau f_0 + a_2 f_0^2 + a_3 f_0^3 + \cdots \tag{5}$$

したがって、(2) 式と比べれば、

$$\Psi(t) = \int_0^t \alpha(\tau)d\tau \tag{6}$$

となっていることがわかる。$\Psi(t)$ は、**緩和関数**と呼ばれ、(6) 式を時間微分すると、$\alpha(t) = \dot{\Psi}(t)$ が成り立つことが分かる。

$x(t) = \langle X(t) \rangle$ は、遷移確率で表されるが、遷移確率は、f_0 の関数になっている。さらに、$t > 0$ で外場は時間変化しないので、遷移確率は定常過程のものと同じ形をしている。そこで、これを $T(x, x', t; f_0)$ と書くことにする。また、**仮定 1** から、$t = 0$ の確率分布は、$f_0 = 0$ の平衡分布だから、それを $P_{\mathrm{eq}}(x')$ とかくと、

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x \int_{-\infty}^{\infty} T(x, x', t; f_0) P_{\mathrm{eq}}(x') dx dx' \tag{7}$$

$\Psi(t)$ を求めるには、遷移確率 $T(x, x', t; f_0)$ を **f_0 で展開し、2 次以上を無視すれば良い。**

(4) 具体例

液体に外場をかける (多変数の場合 → 宿題 34 参照)。

$$X_1 = \sum_i^N e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \tag{8}$$

ここで、$\mathbf{r}_i$ は、i 番目の粒子の位置、N は、粒子数を表す。

仮定 3 は、エネルギーが

$$E = E_0 + \sum_i^N \phi(\mathbf{r}_i) \tag{9}$$

と書けることから確かめられる。ただし、$\phi(\mathbf{r})$ は、外場のポテンシャルで、例えば、荷電粒子ならば、$V(\mathbf{r})$ を電位として、$\phi(\mathbf{r}) = -qV(\mathbf{r})$ となる。(9) 式の 2 項目は

$$\sum_i^N \phi(\mathbf{r}_i) = \sum_i^N \int d\mathbf{k}\tilde{\phi}_k e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} = \int d\mathbf{k}\tilde{\phi}_k X_1^* \tag{10}$$

ここで、$\tilde{\phi}_k$ は、$\phi(\mathbf{r}_i)$ のフーリエ変換。ゆえに、

$$E = E_0 + \int d\mathbf{k}'\tilde{\phi}'_k X_1^* \tag{11}$$

特に $\tilde{\phi}_k = \tilde{\phi}\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ を仮定すると (宿題 35 参照)、

$$E = E_0 + \tilde{\phi}X_1^* \tag{12}$$

したがって、$\boxed{X_2 = X_1^*}$ とすれば、宿題 34 の意味での**仮定 3** を満たせる ($N = 2, f_1 = 0, f_2 = \tilde{\phi}$)。ただし、**符号が違う**事に注意。

この $\tilde{\phi}$ に対する応答を考えると

$$\langle X_1(t)\rangle = \int_{-\infty}^t \alpha_{12}(t-t')\tilde{\phi}(t')dt' \tag{13}$$

久保公式は、

$$\alpha_{12}(t) = \beta\langle \dot{X}_1(t)X_2(0)\rangle \tag{14}$$

となる。通常の久保公式と符号が違うのは、(12) 式の符号が**仮定 3** と違うため。(14) は、

$$\alpha_{12}(t) = \beta\frac{d}{dt}F(k,t) \tag{15}$$

と書かれる。ここで、

$$F(k,t) = \langle X_1(t)X_2(0)\rangle = \langle X_1(t)X_1^*(0)\rangle \tag{16}$$

$$= \sum_{ij}^{N} \langle e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i(t) - i\mathbf{k}\mathbf{r}_j(0)}\rangle \tag{17}$$

これは、**中間散乱関数**と呼ばれる。

(14) 式を時間についてフーリエ変換すると、第 1 種揺動散逸定理が得られる (宿題 36 参照)。

$$\alpha''_\omega = -\frac{\omega\beta}{2}S(k,\omega) \tag{18}$$

ここで、α''_ω は、(28) 式で定義される α_ω の虚部、$S(k,\omega)$ は、**動的構造因子**と呼ばれ、

$$S(k,\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} F(k,t)e^{i\omega t} \tag{19}$$

で表される。

宿題:

34 (20 点) N 個の変数 $(\{X_\mu(t)\} = X_1(t), X_2(t), \ldots, X_N(t))$ と外場 $(\{f_\mu(t)\} = f_1(t), f_2(t), \ldots, f_N(t))$ があるとき、久保公式を考えよう。1 個の変数の時と同様、N 個の変数の分布は、FP 方程式に従い、その他の仮定も 1. から 3. まで、同様に成り立っている。ただし、エネルギーは、

$$E(\{x_\mu\}) = E_0(\{x_\mu\}) - \sum_{\mu}^{N} x_\mu f_\mu(t) \tag{20}$$

と表される。このとき、多変数の久保公式

$$\alpha_{\mu,\nu}(t) = -\beta\langle \dot{X}_\mu(t)X_\nu(0)\rangle \tag{21}$$

を遷移確率を使って証明しなさい。ただし、$\alpha_{\mu,\nu}(t)$ は、

$$\langle X_\mu(t)\rangle = \sum_{\nu}^{N} \int_{-\infty}^{t} \alpha_{\mu,\nu}(t-t')f_\nu(t')dt' \tag{22}$$

で、定義されている。

35 (20 点) 液体に外場をかける例で $\tilde{\phi}_k = \tilde{\phi}\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ という仮定をしないと線形応答 (13) 式や久保公式 (14) 式がどのようになるか考えなさい。

36 (30 点) 第 1 種揺動散逸定理

久保公式

$$\alpha(t) = -\beta\langle \dot{X}(t)X(0)\rangle \tag{23}$$

のフーリエ変換を考える。ところが、$\alpha(t)$ は $t \geq 0$ でしか定義されていない。**つまり上式は、$t \geq 0$ でしか成り立たない。** したがって、単にフーリエ変換する事ができない。そこで、次の手順で第 1 種揺動散逸定理を証明しなさい。

(a) 次で定義されるフーリエ変換とラプラス変換

$$\tilde{\psi}(s) = \int_0^\infty \psi(t)e^{-st}dt \qquad \text{：ラプラス変換} \tag{24}$$

$$\psi(\omega) = \int_{-\infty}^\infty \psi(t)e^{i\omega t}dt \qquad \text{：フーリエ変換} \tag{25}$$

の間に、

$$\psi(z) = 2\lim_{\epsilon\to+0} \Re\tilde{\psi}(-iz+\epsilon) \tag{26}$$

が成り立つことを示しなさい。ただし、$\psi(t)$ は偶関数である。

(b) 久保公式が $t \geq 0$ で成り立つことを使って、久保公式をラプラス変換をし、それから (26) 式により、第 1 種揺動散逸定理

$$\alpha''_\omega = \frac{\omega\beta}{2}\psi_\omega \tag{27}$$

を導け。ただし、

$$\alpha_\omega = \int_0^\infty \alpha(t)e^{i\omega t}dt \tag{28}$$

$$\psi(\omega) = \int_{-\infty}^\infty \langle X(t)X\rangle e^{i\omega t}dt \tag{29}$$

で、α''_ω は、α_ω の虚部を表す。

37 (30 点) 久保公式や揺動散逸定理を使った例をまとめ、レポートにしなさい。外場や応答する変数を具体的に説明し、それに対応する久保公式や揺動散逸定理を書き説明しなさい。また、授業でやった仮定を満たしているかどうかを論じなさい。満たしていないものを挙げても良い。ただし、授業でやったものと 30 の問題で挙げたものを除く。参照した文献は名前を明らかにすること。

38 (20 点) 久保公式が成り立つ仮定がすべて成り立っている時、外場がかかっている時の非平衡の分布関数 $P(x,t)$ を、外場が 0 の時の平衡分布と遷移確率で表しなさい。